



UNIwersytet Medyczny im. Karola Marcinkowskiego w Poznaniu

Katedra i Zakład Technologii Chemicznej Środków Leczniczych

ul. Rokietnicka 3
60-806 Poznań

tel.: (+48 61) 641 84 27

Poznań, 31.01.2025 r.

RECENZJA

całości kształtu dorobku naukowego, osiągnięć wynikających z ustawy oraz działalności dydaktycznej i organizacyjnej doktora Jakuba Grajewskiego przygotowana na potrzeby postępowania habilitacyjnego

1. Dane osobowe oraz rozwój naukowy i zawodowy

Pan doktor Jakub Grajewski uzyskał tytuł magistra chemii na Wydziale Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu (UAM) na podstawie pracy magisterskiej pt. *Synteza nukleozydów pirymidynowych deuterowanych w pozycji 5*, pod kierownictwem prof. dr hab. Wiesława Antkowiaka w 2000 r. Po ukończeniu studiów doktoranckich, uzyskał stopień doktora nauk chemicznych w 2005 r., na podstawie pracy doktorskiej pt. *Nowe zastosowanie spektroskopii dichroizmu kołowego w badaniach stereochemicznych*, którą zrealizował pod promotorstwem prof. dr hab. Jacka Gawrońskiego na Wydziale Chemii UAM. Od 2005 roku pracuje na Wydziale Chemii UAM, obecnie na stanowisku adiunkta w Zakładzie Stereochemii Organicznej.

2. Dorobek naukowy

Łączny dorobek naukowy doktora Jakuba Grajewskiego określony sumarycznym współczynnikiem oddziaływania IF publikacji wynosi 104,233, przy liczbie cytowań prac wg WoS 343 (bez autocytowań 308) i Indeksie Hirscha 11. Habilitant jest ponadto współautorem dziewięciu pozycji dydaktycznych jako współautor rozdziałów i autor opracowań, a także tłumaczem sześciu pozycji książkowych z tematyki chemii, chemii organicznej, nieorganicznej i fizycznej. **Przed uzyskaniem stopnia doktora** opublikował 7 prac w czasopiśmie, takich jak *Chem. Commun* (2002), *J. Org. Chem.* (2003), *Org. Lett.* (2003), *Tetrahedron: Asymmetry* (2004), *Monatsh. Chem.* (2005) oraz *Chirality* (2005). **Po uzyskaniu stopnia doktora** nastąpił znaczący przyrost dorobku publikacyjnego, gdyż dr Jakub Grajewski opublikował 26 prac w czasopiśmie, takich jak *Chem. Europ. J.* (2006), *Rapid Commun. Mass Spectrom.* (2006), *Tetrahedron: Asymmetry* (2006, 2007, 2016, 2017), *Magn. Reson. Chem.* (2007, 2009, 2011), *Chirality* (2008), *New J. Chem.* (2010), *Wiad. Chem.* (2013), *ChemPhysChem* (2014), *Org. Biomol. Chem.* (2018), *Chemical Commun.* (2018), *Chem. Rec.* (2018), *J. Fluor. Chem.* (2019), *Molecules* (2020, 2021, 2022, 2024), *J. Mol. Struct.* (2020), *ChemPlusChem* (2022), *Polymer Chem.* (2022), *Polyhedron* (2022), *Sci. Rep.* (2023). W dorobku Habilitanta znajduje się ponadto pięć wystąpień posterowych i jedno ustne na konferencjach krajowych oraz dwa patenty zagraniczne: WO Patent WO2016198143A1 (2016) oraz EP Patent EP 3 307 848 B1 (2019).

Dr Jakub Grajewski brał udział jako wykonawca w realizacji sześciu projektów naukowych, które były finansowane z MNiSW (dwa projekty), NCN (dwa projekty), NCBiR (jeden projekt) lub przez firmę Merck (jeden projekt). Habilitant odbył także staż naukowy podoktorski w latach 2007-2009 na Westfalskim Uniwersytecie Wilhelma w Münster w grupie prof. Güntera Haufe. Ponadto w ramach programu europejskiego „Uniwersytet jutra” realizowanego na UAM odbył dwie kilkudniowe wizyty studyjne dydaktyczne na Uniwersytecie Rovira i Virgili w Tarragonie w Hiszpanii w 2020 i 2024 r.

Habilitant wykonuje prace eksperckie, co przełożyło się na przygotowanie dwudziestu recenzji manuskryptów dla czasopism z dziedziny chemii i nanotechnologii. Ponadto przygotował sześć recenzji dla polskich instytucji finansujących badania. Od 2012 r. jest członkiem Polskiego Towarzystwa Chemicznego, w którym pracuje jako sekretarz Komisji ds. Medali oraz Komisji

ds. Nagród, a ponadto administruje stronę internetową Oddziału Poznańskiego. Dr Jakub Grajewski wspierał także siedmiokrotnie komitety organizacyjne konferencji krajowych organizowanych w Poznaniu przez macierzysty Wydział oraz Polskie Towarzystwo Chemiczne w charakterze członka lub sekretarza komitetów organizacyjnych.

Habilitant został za swoją działalność nagrodzony, otrzymując kilkakrotnie Nagrody zespołowe I, II i III stopnia JM Rektora UAM za działalność organizacyjną, dydaktyczną i naukową. Uzyskał także dyplom uznania za wkład pracy na rzecz PTChem w 2016 r.

3. Dorobek naukowy stanowiący podstawę Osiągnięcia

Dr Jakub Grajewski przedstawił Osiągnięcie naukowe pt. „*Konformacje chiralnych poliaromatycznych związków organicznych o zróżnicowanej zawadzie sterycznej*”, na które składa się Autoreferat oraz siedem prac oryginalnych i dwie publikacje przeglądowe opublikowane w latach 2014-2022 w czasopismach znajdujących się w bazie JCR o sumarycznym współczynniku oddziaływania IF wynoszącym 34,804. Habilitant jest w dziewięciu pracach Osiągnięcia: cztery razy pierwszym autorem, jeden raz drugim autorem, dwa razy czwartym autorem, dwa razy autorem seniorem, pełniąc jednocześnie w pięciu z nich obowiązki autora korespondencyjnego. Wyniki badań zostały opublikowane w czasopismach z dziedziny chemii o ustalonej renomie międzynarodowej. W świetle deklaracji współautorów, zawartych w oświadczeniach oraz danych umieszczonych w Autoreferacie, udział Habilitanta w publikacjach jest bez wątpienia znaczący, a dotyczy opracowania lub współopracowania koncepcji i planu badań, syntezy i oczyszczenia wybranych lub wszystkich związków, wykonania całości lub części charakterystyki spektroskopowej, pomiarów i obliczeń widm UV i CD oraz ich interpretacji, przygotowania manuskryptów lub ich części, a w niektórych pracach korespondencji z edytorem i przygotowania odpowiedzi na recenzje.

W **Autoreferacie** Habilitant najpierw nakreślił przedmiot badań, którym stało się określenie preferencji konformacyjnych chiralnych modelowych związków organicznych z chromoforami aromatycznymi i zróżnicowaną zawadą steryczną. Obecność fragmentów π -elektronowych, determinujących właściwości spektroskopowe pozwoliła na analizę konformacyjną związków z użyciem dichroizmu kołowego. Zróżnicowanie badanych związków chiralnych włączonych do Osiągnięcia sprawia, że perspektywne ich zastosowania obejmują chemię supramolekularną, ale także chemię materiałową i chemię medycyną. Habilitant w swoich badaniach skupił się na związkach z grupami trifenyloetylowymi i benzhydrylowymi, a także poliiminowymi i poliaminowymi makrocyklami z motywem (*R,R*)-1,2-diaminocykloheksanu. Badania przeprowadzone na związkach zawierających w strukturze fragmenty difenyl- i trifenyloetylo- stały się przedmiotem publikacji w *ChemPhysChem* (2014), *Tetrahedron: Assymetry* (2016) i *ChemPhysChem* (2017). Na wstępie Autoreferatu Habilitant uzasadnił podjęcie tematyki grup trifenyloetylowych jako grup raportujących chiralność sąsiedniego centrum stereogenicznego i zastosowanie spektroskopii dichroizmu kołowego jako metody pośredniej przy określaniu konfiguracji absolutnej macierzystego alkoholu lub aminy. W pracy *ChemPhysChem* (2014) zawarł badania oddziaływań wewnątrzcząsteczkowych grup trifenyloetylowych w związkach pochodnych chiralnych cyklicznych 1,2-dioli oraz 1,2-diamin. Wyniki badań zostały przedstawione w kontekście danych z baz krystalograficznych oraz poddane ocenie preferencji konformacyjnych. Jako modele do badań zastosowano czyste optycznie *trans*-1,2-dipodstawione pochodne cykloheksanu i cyklopentanu. Związki poddano analizie w cieple stałym z użyciem analizy rentgenostrukturalnej oraz w roztworze z użyciem widm ECD i metod obliczeniowych TD-DFT. W pracy opublikowanej w *Tetrahedron: Assymetry* (2016) poddano analizie trifenyloetylową pochodną (*R*)-*N*-metylo- α -metylobenzyloaminy i przedstawiono interesującą dyskusję wyników podstawienia substratu grupą trifenyloetylową oraz uzyskanego produktu reakcji, którym okazał się produkt jej para-podstawienia. Uzyskany wynik reakcji zachęcił Habilitanta do użycia mniej zatłoczonych sterycznie substratów, w postaci (*R*)- α -metylobenzyloaminy i jej *N*-metylowej pochodnej, co doprowadziło do spodziewanych produktów z grupami *N*-trifenyloetylowymi. Uzyskane produkty zostały poddane analizie rentgenostrukturalnej oraz

obliczeniowej metodą DFT. Dla analizowanych konformerów obliczono widma ECD, uwzględniając w sumarycznym widmie CD ich procentowy udział i odnosząc do energii poszczególnych konformerów. Z kolei w publikacji *ChemPhysChem* (2017), Habilitant analizował rolę grupy benzhydrylowej jako receptora chiralności w odniesieniu do uzyskanych wyników dla związków z grupami mono- i ditrifenyłometylowymi. Badania te przeprowadził modyfikując grupami benzhydrylowymi kwas (*R,R*)-winowy. Głównym celem badań było określenie właściwości chiralnooptycznych eterów benzhydrylowych i dibenzhydrylowych w ciele stałym i w roztworze, w oparciu o spektroskopię NMR, elektronowy dichroizm kołowy oraz obliczenia DFT. Badania ECD, poparte danymi obliczeniowymi pozwoliły na wyciągnięcie konkluzji, że aktywność optyczna związków modelowych wynika z indukowanej aktywności optycznej w poszczególnych chromoforach difenyłometylowych, a nie jest wynikiem oddziaływań pomiędzy chromoforami.

Kolejny duży blok tematyczny podjęty w pracach włączonych do Osiągnięcia, takich jak *Org. Biomol. Chem.* (2018), *Chem. Commun.* (2019), *J. Mol. Struct.* (2020), *ChemPlusChem* (2022), dotyczy chiralnych poliaromatycznych pochodnych makrocyklicznych. Ugrupowania poliaromatyczne stały się przedmiotem zainteresowania Habilitanta z uwagi na ich znaczenie jako łączników w związkach makrocyklicznych, które zwiększają wielkość pierścienia, wpływają na właściwości hydrofobowe i pełnią rolę w oddziaływaniach supramolekularnych. W publikacji *Org. Biomol. Chem.* (2018) Habilitant skupił się na chiralnych poliiminowych związkach makrocyklicznych zawierających w strukturze atom węgla spiro. W swoich badaniach dążył do osiągnięcia chiralnego zróżnicowania konformerów pentaerytrytu poprzez utworzenie pierścieni pięcio- i sześcioczłonowych i wprowadzenie do cząsteczki centrum chiralności, co stało się możliwym poprzez utworzenie ugrupowań acetalowych lub estrów boronowych. Dr Jakub Grajewski uzyskane związki makrocykliczne poddał badaniom NMR, dichroizmu kołowego oraz obliczeniowym i rentgenostrukturalnym. W pracy opublikowanej w *Chem. Commun.* (2019) podjęto się uzyskania poliaminowych makrocykli, określanych jako gigantocykle, co umiejętnie połączono z analizą fizykochemiczną, badaniami spektroskopowymi NMR i ECD, oceną właściwości nanoporowatych oraz zdolności do rozpoznania molekularnego, pożądaných w zastosowaniach dla chemii materiałowej. Badania dotyczące poliiminowych chiralnych związków makrocyklicznych zostały rozbudowane w publikacji *J. Mol. Struct.* (2020) za sprawą uzyskania związku makrocyklicznego z aldehydem nieliniowym i atomem węgla spiro, który został poddany ocenie fizykochemicznej. Z kolei w publikacji *ChemPlusChem* (2022) Habilitant przedstawił syntezę i właściwości fizykochemiczne makrocykli iminowych, posiadających odwracalną zdolność do przechodzenia w formę nadtlenu w obrębie pierścieni antracenowych z możliwością uwalniania tlenu singletowego w ramach procesu fotochemicznego lub termicznego. Badania poparto wnikliwą analizą spektroskopową NMR i CD, analizą rentgenostrukturalną, badaniami fotochemicznymi oraz obliczeniami teoretycznymi.

W pracy przeglądowej *The Chemical Record* (2019), dr Jakub Grajewski omówił możliwości syntezy związków makrocyklicznych z grupami poliiminowymi. Z kolei w pracy przeglądowej opublikowanej w *Molecules* (2022) przedstawił chemię związków makrocyklicznych zawierających atomy azotu, odnosząc się w sposób bardziej szczegółowy do możliwości ich syntezy.

Reasumując:

- (i) Zaprezentowane w Osiągnięciu badania wskazują na warsztatowo ugruntowaną wiedzę oraz umiejętności Habilitanta, w szczególności doskonałą znajomość chemii analitycznej, spektroskopii oraz metod obliczeniowych. Stwierdzam, że stanowią znaczny wkład w rozwój wskazanej dyscypliny nauk chemicznych, w zakresie badań nad konformacjami chiralnych związków poliaromatycznych o zróżnicowanej zawadzie przestrzennej;
- (ii) Badania Habilitanta zostały opublikowane w postaci siedmiu prac oryginalnych i dwóch prac przeglądowych w czasopiśmie naukowych z chemii o uznanej renomie i wysokim współczynniku wpływu IF wynoszącym sumarycznie 34,804;

- (iii) Badania zawarte w Osiągnięciu posiadają wiele walorów poznawczych z uwagi na przedmiot badań, zastosowaną metodykę i sposób prezentacji, a także stwarzają perspektywy zastosowań praktycznych w chemii jako nowe materiały i sondy chromoforowe oraz w chemii medycznej jako fotosensybilizatory.
- (iv) Oceniając całościowo dobór tematyki składającej się na Osiągnięcie habilitacyjne, nie można pominąć konsekwencji w realizacji wyznaczonego celu oraz dającej się zauważyć w pracach publikowanych w kolejnych latach wzrastającej samodzielności naukowej. Habilitant w badaniach wykorzystał techniki spektroskopowe, takie jak: UV-VIS, NMR, elektronowy dichroizm kołowy (ECD), spektrometrię mas, analizę krystalograficzną, a także obliczenia teoretyczne metodami semiempirycznymi oraz DFT, co pozwoliło określić konformacje bardzo zróżnicowanych strukturalnie związków w ujęciu statycznym i dynamicznym, w tym względnie biorąc pod uwagę kwestie temperatury, pH, oddziaływań międzycząsteczkowych oraz termodynamiki.

4. Charakterystyka działalności dydaktycznej i organizacyjnej

Dr Jakub Grajewski **posiada doświadczenie dydaktyczne** w prowadzeniu różnych form zajęć, w tym laboratoryjnych, proseminariów i wykładów. Corocznie zajmuje się współorganizowaniem wydarzeń popularyzatorskich, takich jak „Dni Otwarte”, „Noc Naukowców” oraz wizyt młodzieży szkół na Wydziale Chemii. Pełnił obowiązki opiekuna w siedmiu pracach magisterskich, sześciu licencyjnych a także jednokrotnie promotora pomocniczego w przewodzie doktorskim. Ponadto przewodniczył komisjom w 360 egzaminach licencyjnych i magisterskich.

Dr Jakub Grajewski **angażuje się w przedsięwzięcia organizacyjne** macierzystej Uczelni i Wydziału Chemii. Pełni lub pełnił następujące funkcje: (i) kierownika Zespołu Dydaktycznego Chemii Organicznej i Bioorganicznej (obecnie Laboratorium Dydaktycznego Chemii Organicznej i Bioorganicznej) od roku 2014, (ii) członka Wydziałowego Zespół Oceniającego, Rady Dziekańskiej, Rady Dyscypliny Chemia, Senatu UAM (kadencja 2020-2024), Senackiej Komisji ds. Finansów (kadencja 2020-2024), Senackiej Komisji ds. Rozwoju (kadencja 2020-2024), Zespołu do spraw rocznego wynagrodzenia motywacyjnego 2016-2020, Zespołu ds. Zapewnienia Jakości Kształcenia, Rady ds. Kształcenia Szkoły Nauk Ścisłych, Rady Programowej Wydziału Chemii, Komisji przygotowującej raport samooceny PKA (2023), Komisji ds. oceny prac w ramach sesji posterowej magistrantów Wydziału Chemii, Komisji przetargowej, a także komisji konkursowych do rozstrzygnięcia konkursów na stanowiska adiunkta.

Reasumując:

Pan Jakub Grajewski jest zaangażowany w organizację i prowadzenie dydaktyki, a także działania organizacyjne na macierzystej Uczelni.

5. Ocena ogólna

Dorobek naukowy, dydaktyczny i organizacyjny doktora Jakuba Grajewskiego spełnia wszystkie wymogi art. 219 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz.U. z 30 sierpnia 2018 r., poz. 1668). Osiągnięcie naukowe zostało przedstawione w formie cyklu powiązanych tematycznie prac opublikowanych w czasopismach naukowych ujętych w wykazie sporządzonym zgodnie z przepisami wydanymi na podstawie art. 267 ust. 2 pkt 2 lit. b ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce, a inne dokonania Habilitanta spełniają warunki określone w art. 219 ust. 1 pkt 3 ww. ustawy. Kandydat wykazuje się istotną aktywnością naukową realizowaną w więcej niż jednej jednostce spełniając warunki określone w art. 219 ust. 1 pkt 3 ww. ustawy.

Zwracam się do Wysokiej Rady Dyscypliny Nauki Chemiczne Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu o dopuszczenie dr Jakuba Grajewskiego do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki chemiczne.


prof. dr hab. Tomasz Gośliński